

Fig. 2. Intermolecular arrangement in [2.2.2.2]paracyclophane: projection on the *ac* plane.

adjacent rings are: $A,B = 50.6$, $B,C = 64.0$, $C,D = 62.3$, $A,D = 53.9^\circ$ with standard deviations of 0.8° .

The *A* and *C* rings make angles of respectively -33 and 34° with plane *P*, while *B* and *D* make angles of 83 and 85° with that plane. This arrangement is less planar than found in the related molecule [2.2.2.2]paracyclophanetetraene (Ljungström, Lindquist & Wennerström, 1978).

The authors are indebted to Professor P. Baret and to P. Chautemps for supplying the compound and to

Professor J. Lajzéróvicz for valuable comments. Thanks are due to G. d'Assenza for technical assistance.

References

- BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1962). *ORXFLS-3*. Report ORNL-TM-271. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- COHEN-ADDAD, C., BARET, P., CHAUTEPS, P. & PIERRE, J. L. (1983). *Acta Cryst.* **C39**, 1346–1349.
- COHEN-ADDAD, C., LEBARS, M., RENAULT, A. & BARET, P. (1984). *Acta Cryst.* **C40**, 1927–1931.
- GERMAIN, G., MAIN, P. & WOOLFSON, M. M. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 368–376.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor D. Reidel, Dordrecht.)
- LJUNGSTRÖM, E., LINDQUIST, O. & WENNERSTRÖM, O. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 1889–1893.
- OLSSON, T., TANNER, D., THULIN, B., WENNERSTRÖM, O. & LILJEFORS, T. (1981). *Tetrahedron*, **37**, 3473–3483.
- PIERRE, J. L., BARET, P., CHAUTEPS, P. & ARMAND, M. (1981). *J. Am. Chem. Soc.* **103**, 2986–2988.
- ROLLETT, J. S. (1965). *Computing Methods in Crystallography*, p. 114. Oxford: Pergamon.
- TABUSHI, I., YAMADA, H. & KURODA, Y. (1975). *J. Org. Chem.* **40**, 1946.
- TROUGHTON, P. G. H. (1969). PhD Thesis, Imperial College, London.

Acta Cryst. (1985). **C41**, 775–778

Structures du N^1 -(Méthoxy-6 méthyl-2 pyrimidinyl-4)sulfanilamide (Sulfamétomidine), $C_{12}H_{14}N_4O_3S$, et d'un de ses Solvates, $C_{12}H_{14}N_4O_3S \cdot H_2O$

PAR J. RAMBAUD, L. MAURY, B. PAUVERT, G. BERGE, M. AUDRAN ET Y. LASSERRE

Groupe 'Polymorphisme et Biodisponibilité', UER Sciences Pharmaceutiques, Montpellier, France

ET J.-P. DECLERCQ

Laboratoire de Chimie Physique et de Cristallographie, Université de Louvain 1, place Louis Pasteur, B-1348, Louvain-la-Neuve, Belgique

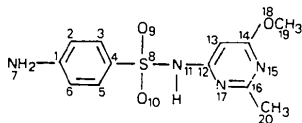
(Reçu le 21 mars 1984, accepté le 31 décembre 1984)

Abstract. Sulfamethomidine, form I: $M_r = 294.33$, triclinic, $P\bar{1}$, $a = 14.180$ (5), $b = 11.643$ (4), $c = 8.619$ (2) Å, $\alpha = 91.08$ (2), $\beta = 101.39$ (2), $\gamma = 90.62$ (3)°, $V = 1395$ (1) Å³, $Z = 4$, $D_m = 1.393$, $D_x = 1.40$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$ Å, $F(000) = 616$, $\mu = 0.234$ mm⁻¹, room temperature, final $R = 0.0514$ for 3221 observed reflections. Sulfamethomidine monohydrate, form SII: $M_r = 312.35$, orthorhombic, $P2_12_12_1$, $a = 7.525$ (2), $b = 16.924$ (4), $c = 11.785$ (3) Å, $V = 1501.0$ (7) Å³, $Z = 4$, $D_m = 1.365$, $D_x = 1.38$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$ Å,

$F(000) = 656$, $\mu = 0.225$ mm⁻¹, room temperature, final $R = 0.0405$ for 1108 observed reflections. The asymmetric unit of form I contains two independent molecules. The molecular structures of I and SII show significant differences in bond lengths and bond angles because of the transfer of the proton on the amide nitrogen to the pyrimidinyl nitrogen in SII [value for SII first, average value for molecules *A* and *B* of I second: S(8)–N(11) 1.582 (4), 1.644 (3); C(12)–N(11) 1.339 (6), 1.400 (6); C(12)–N(17) 1.375 (6), 1.342 (5) Å. S(8)–N(11)–C(12) 122.1 (3), 125.9 (3);

C(12)—N(17)—C(16) 124.3 (4), 116.1 (3)°]. There is one water molecule in the asymmetric unit of the solvate.

Introduction. Notre recherche sur le polymorphisme de substances médicamenteuses nous a conduit à étudier celui du sulfamétomidine.



Nous avons signalé dans un travail antérieur (Maury, Pauvert, Rambaud, Audran, Lasserre & Berge, 1984) l'existence de deux formes polymorphes et de deux solvates pour ce sulfamide. Cependant une ambiguïté demeurait quant à la différenciation de la forme II et du solvate SII. Dans l'impossibilité d'obtenir des cristaux mesurables de la forme II nous avons dans un premier temps déterminé les structures de la forme I et du solvate SII.

Ces deux molécules, forme I et solvate SII, s'obtiennent par cristallisation dans le même solvant, du même produit d'origine: on pourra donc obtenir l'une ou l'autre selon les conditions de saturation des solutions.

Partie expérimentale. Les densités ont été mesurées par flottaison dans le mélange de solvants: huile de vaseline/CCl₄.

Forme I. Cristaux obtenus dans l'alcool absolu, après refroidissement d'une solution saturée à l'ébullition, rhomboédres translucides, 0,30 × 0,25 × 0,40 mm. Diffractomètre Syntex P₂₁, monochromateur graphite. 4116 réflexions indépendantes dont 3221 considérées comme observées $I \geq 2,5\sigma(I)$; $3 \leq 2\theta \leq 47^\circ$, h 0→15, k -13→13, l -9→9. Paramètres cristallins affinés à partir de 15 réflexions indépendantes. 1 réflexion standard mesurée toutes les 50 réflexions, pas de déviation. Pas de correction d'absorption. Méthodes directes, programme MULTAN80 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1980). Affinement (basé sur F) par moindres carrés en matrice complète avec le programme SHELX76 (Sheldrick, 1976). Schéma de pondération: $w = 1/[\sigma^2(F) + 0,000034F^2]$. Anisotropie pour les atomes non hydrogène. Hydrogènes placés par Fourier-différence. $\Delta\rho < 0,8$ e Å⁻³ dans la Fourier-différence finale. $(\Delta/\sigma)_{\max} = 0,5$ pour les atomes lourds, et 1,2 pour les H. R final = 0,0514 et $wR = 0,0527$.

Solvate SII. Cristaux obtenus dans l'alcool absolu par évaporation d'une solution saturée à la température ambiante, aspect irrégulier, 0,25 × 0,15 × 0,50 mm. Diffractomètre Syntex P₂₁, monochromateur graphite. 1312 réflexions indépendantes mesurées, 1108 observées $I \geq 2,5\sigma(I)$; $2\theta_{\max} = 47^\circ$, h 0→8, k 0→18, l 0→13. Paramètres cristallins affinés à partir de 15 réflexions indépendantes. Pas de correction d'absorption.

Méthodes directes, programme MULTAN80. Affinement (basé sur F) par moindres carrés en matrice complète, programme SHELX76. Schéma de pondération: $w = 1/[\sigma^2(F) + 0,01921F^2]$. Molécule d'eau placée par Fourier-différence ainsi que tous les atomes d'hydrogène. Anisotropie pour les atomes lourds. $\Delta\rho < 0,8$ e Å⁻³ dans la Fourier-différence finale. $(\Delta/\sigma)_{\max} = 0,5$ pour les atomes lourds, et 1 pour les H. R final = 0,0405 et $wR = 0,0437$.

Les extinctions secondaires n'ont pas été utilisées. Les facteurs de diffusion sont extraits des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974).

Discussion. Les Tableaux 1 et 2 donnent les coordonnées atomiques des atomes non hydrogène, les Tableaux 3 et 4 les distances interatomiques et les angles de valence.*

Cette étude structurale nous a permis de mettre en évidence un certain nombre de différences entre ces deux composés:

-L'unité asymétrique de la forme I est constituée de deux molécules indépendantes qui ne sont liées entre elles que par des forces de van der Waals (Fig. 1). Dans l'unité asymétrique du solvate SII apparaît une molécule d'eau liée à une molécule de sulfamide par une liaison hydrogène relativement forte (Fig. 2).

-Le tétraèdre du soufre est plus régulier dans le solvate que dans les autres sulfamides étudiés précédemment (Kruger & Gafner, 1971; Rambaud, Roques, Declercq, Germain & Sabon, 1981).

-Mais le fait le plus important est, dans le cas du solvate SII, le transfert du proton H(11) de l'azote amide N(11) sur l'azote pyrimidinyl N(17). Le déplacement de ce proton entraîne une variation notable dans les valeurs des distances interatomiques autour des atomes S(8), N(11), C(12) et N(17) comme le montre la Fig. 3. De même, il est vraisemblablement la cause de la variation de l'angle que font entre eux les plans [C(12), C(13), C(14), C(15), C(16), N(17)] et [S(8), O(9), O(10)], respectivement de 23 et 14° pour la forme I et 61° pour le solvate SII (Tableau 5, déposé), seul écart significatif que l'on rencontre entre ces deux conformations. L'étude des angles dièdres ne montre pas, quant à elle, de perturbation majeure.

-Le dernier point de disparité entre ces deux composés se situe au niveau des liaisons hydrogène (Tableau 6, déposé). Dans la forme I, la présence de deux molécules dans l'unité asymétrique entraîne l'existence de cinq liaisons hydrogène variant de 2,908 à 3,165 Å; le solvate SII présente quatre liaisons dont

* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope et des paramètres des atomes H, et les Tableaux 5 et 6 ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 39926: 26 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. *Coordonnées atomiques* ($\times 10^4$) et B_{eq} pour le sulfamétomidine, forme I

$$B_{eq} = \frac{8}{3}\pi^2 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

	Molécule A				$B_{eq}(\text{Å}^2)$	Molécule B			
	x	y	z	$B_{eq}(\text{Å}^2)$		x	y	z	$B_{eq}(\text{Å}^2)$
C(1)	4198 (3)	2323 (3)	5115 (5)	4,26	1690 (3)	1215 (3)	6192 (5)	3,57	
C(2)	3497 (3)	1856 (3)	3899 (5)	4,47	1549 (3)	2337 (3)	5620 (5)	3,78	
C(3)	3326 (3)	2296 (3)	2412 (5)	4,11	1135 (3)	2525 (3)	4079 (5)	3,85	
C(4)	3884 (2)	3211 (3)	2083 (4)	3,31	834 (3)	1591 (3)	3051 (5)	3,67	
C(5)	4610 (3)	3663 (3)	3259 (5)	4,41	929 (3)	472 (3)	3603 (5)	3,99	
C(6)	4759 (3)	3232 (4)	4766 (5)	4,88	1349 (3)	299 (3)	5157 (5)	4,19	
N(7)	4333 (3)	1906 (3)	8614 (4)	5,87	2199 (3)	1042 (3)	7675 (4)	4,86	
S(8)	3686 (1)	3787 (1)	200 (1)	3,70	376 (1)	1816 (1)	1058 (1)	4,13	
O(9)	4529 (2)	3681 (2)	-474 (3)	4,70	472 (2)	3010 (2)	749 (3)	5,03	
O(10)	2800 (2)	3348 (2)	-674 (3)	4,71	766 (2)	978 (3)	128 (3)	5,12	
N(11)	3623 (2)	5187 (2)	447 (3)	4,01	-775 (2)	1484 (3)	723 (4)	4,34	
C(12)	2979 (3)	5750 (3)	1231 (4)	3,53	-1481 (3)	2039 (3)	1380 (5)	3,77	
C(13)	2109 (3)	5276 (3)	1399 (4)	4,20	-1362 (3)	3092 (3)	2132 (5)	4,00	
C(14)	1561 (3)	5976 (3)	2208 (4)	4,13	-2149 (3)	3476 (3)	2726 (5)	3,88	
N(15)	1842 (2)	7014 (3)	2752 (4)	4,65	-2976 (2)	2910 (3)	2542 (4)	4,17	
C(16)	2689 (3)	7381 (3)	2495 (5)	4,63	-3023 (3)	1905 (3)	1761 (5)	4,23	
N(17)	3280 (2)	6795 (3)	1779 (4)	4,20	-2306 (2)	1415 (3)	1201 (4)	4,00	
O(18)	741 (2)	5522 (3)	2467 (4)	6,06	-2047 (2)	4494 (2)	3519 (3)	4,69	
C(19)	137 (3)	6247 (4)	3200 (6)	6,18	-2862 (3)	4897 (4)	4127 (5)	4,74	
C(20)	3020 (4)	8585 (3)	3093 (6)	6,43	-3967 (3)	1257 (4)	1485 (7)	5,89	

Tableau 2. *Coordonnées atomiques* ($\times 10^4$) et B_{eq} pour le sulfamétomidine solvate

$$B_{eq} = \frac{8}{3}\pi^2 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

	Molécule A				$B_{eq}(\text{Å}^2)$
	x	y	z	$B_{eq}(\text{Å}^2)$	
C(1)	4818 (8)	-643 (3)	6062 (5)	4,23	
C(2)	6394 (7)	-218 (3)	6147 (5)	4,37	
C(3)	6570 (7)	361 (3)	6970 (5)	3,94	
C(4)	5183 (7)	511 (3)	7724 (4)	3,31	
C(5)	3633 (7)	70 (3)	7647 (5)	3,72	
C(6)	3446 (8)	-502 (3)	6833 (5)	4,28	
N(7)	4627 (10)	-1194 (4)	5223 (6)	6,62	
S(8)	5329 (2)	1274 (1)	8716 (1)	3,43	
O(9)	7144 (5)	1568 (2)	8676 (4)	4,58	
O(10)	4775 (6)	970 (2)	9812 (3)	4,55	
N(11)	3878 (7)	1911 (3)	8393 (4)	3,66	
C(12)	4073 (7)	2396 (3)	7504 (4)	3,29	
C(13)	5498 (9)	2505 (3)	6752 (5)	3,88	
C(14)	5294 (8)	3073 (3)	5920 (4)	3,74	
N(15)	3843 (7)	3518 (3)	5749 (4)	4,18	
C(16)	2506 (7)	3392 (3)	6454 (5)	4,08	
N(17)	2618 (6)	2867 (2)	7302 (4)	3,57	
O(18)	6688 (6)	3184 (3)	5225 (4)	5,33	
C(19)	6595 (12)	3823 (5)	4409 (7)	6,00	
C(20)	825 (10)	3843 (5)	6313 (7)	5,86	
O(21)	-509 (7)	2835 (2)	8535 (4)	4,81	

Tableau 3. *Distances interatomiques* (Å) avec écarts-type entre parenthèses

	Forme I		
	Solvate SII	Molécule A	Molécule B
C(2)-C(1)	1,392 (7)	1,392 (5)	1,407 (5)
C(6)-C(1)	1,395 (7)	1,390 (6)	1,396 (5)
N(7)-C(1)	1,366 (7)	1,367 (6)	1,358 (5)
C(3)-C(2)	1,384 (7)	1,367 (6)	1,365 (6)
C(4)-C(3)	1,394 (6)	1,386 (5)	1,397 (5)
C(5)-C(4)	1,387 (7)	1,385 (5)	1,394 (5)
S(8)-C(4)	1,746 (4)	1,740 (4)	1,738 (4)
C(6)-C(5)	1,370 (7)	1,379 (6)	1,373 (6)
O(9)-S(8)	1,454 (4)	1,434 (3)	1,430 (3)
O(10)-S(8)	1,451 (3)	1,415 (3)	1,434 (3)
N(11)-S(8)	1,582 (4)	1,646 (3)	1,641 (3)
C(12)-N(11)	1,339 (6)	1,399 (5)	1,401 (6)
C(13)-C(12)	1,403 (7)	1,381 (6)	1,369 (6)
N(17)-C(12)	1,375 (6)	1,332 (5)	1,351 (5)
C(14)-C(13)	1,382 (7)	1,401 (6)	1,391 (6)
N(15)-C(14)	1,341 (7)	1,317 (5)	1,319 (5)
O(18)-C(14)	1,344 (6)	1,331 (5)	1,349 (5)
C(16)-N(15)	1,322 (7)	1,331 (6)	1,333 (5)
N(17)-C(16)	1,340 (6)	1,323 (6)	1,337 (6)
C(20)-C(16)	1,487 (8)	1,521 (6)	1,505 (6)
C(19)-O(18)	1,449 (7)	1,434 (6)	1,439 (6)

Tableau 4. *Angles de valence* ($^\circ$) avec écarts-type entre parenthèses

	Forme I		
	Solvate SII	Molécule A	Molécule B
C(6)-C(1)-C(2)	119,7 (0,4)	118,1 (0,4)	118,0 (0,4)
N(7)-C(1)-C(2)	119,6 (0,5)	121,3 (0,4)	120,2 (0,3)
N(7)-C(1)-C(6)	120,7 (0,5)	120,6 (0,4)	121,7 (0,4)
C(3)-C(2)-C(1)	119,9 (0,4)	121,9 (0,4)	121,1 (0,4)
C(4)-C(3)-C(2)	120,2 (0,4)	119,4 (0,3)	119,7 (0,4)
C(5)-C(4)-C(3)	119,4 (0,4)	119,7 (0,3)	120,3 (0,4)
S(8)-C(4)-C(3)	120,9 (0,3)	120,5 (0,3)	120,1 (0,3)
S(8)-C(4)-C(5)	119,6 (0,4)	119,8 (0,3)	119,5 (0,3)
C(6)-C(5)-C(4)	120,8 (0,5)	120,3 (0,4)	119,1 (0,4)
C(5)-C(6)-C(1)	120,0 (0,5)	120,4 (0,4)	121,6 (0,4)
O(9)-S(8)-C(4)	106,9 (0,2)	110,4 (0,2)	108,8 (0,2)
O(10)-S(8)-C(4)	108,4 (0,2)	108,7 (0,2)	109,0 (0,2)
O(10)-S(8)-O(9)	114,9 (0,2)	118,5 (0,2)	119,4 (0,2)
N(11)-S(8)-C(4)	107,4 (0,2)	106,4 (0,2)	107,4 (0,2)
N(11)-S(8)-O(9)	114,0 (0,2)	102,1 (0,2)	108,1 (0,2)
N(11)-S(8)-O(10)	104,9 (0,2)	109,9 (0,2)	103,4 (0,2)
C(12)-N(11)-S(8)	122,1 (0,3)	125,5 (0,3)	126,3 (0,3)
C(13)-C(12)-N(11)	131,1 (0,4)	123,4 (0,3)	124,6 (0,4)
N(17)-C(12)-N(11)	113,8 (0,4)	113,5 (0,3)	112,5 (0,3)
N(17)-C(12)-C(13)	115,0 (0,4)	123,2 (0,4)	122,9 (0,4)
C(14)-C(13)-C(12)	117,0 (0,5)	114,9 (0,3)	115,3 (0,4)
N(15)-C(14)-C(13)	126,0 (0,5)	122,9 (0,4)	123,8 (0,4)
O(18)-C(14)-C(13)	116,3 (0,4)	116,5 (0,3)	117,0 (0,4)
O(18)-C(14)-N(15)	117,8 (0,4)	120,5 (0,4)	119,2 (0,4)
C(16)-N(15)-C(14)	115,8 (0,4)	116,5 (0,4)	116,0 (0,4)
N(17)-C(16)-N(15)	121,9 (0,4)	126,3 (0,4)	126,0 (0,4)
C(20)-C(16)-N(15)	119,7 (0,5)	117,3 (0,4)	117,3 (0,4)
C(20)-C(16)-N(17)	118,5 (0,5)	116,4 (0,4)	116,8 (0,4)
C(16)-N(17)-C(12)	124,3 (0,4)	116,2 (0,3)	115,9 (0,3)
C(19)-O(18)-C(14)	118,1 (0,4)	117,5 (0,3)	117,1 (0,3)

trois – intéressant les molécules d'eau – sont beaucoup plus courtes, ce qui renforce la cohésion de son édifice cristallin. On peut également relier la force de ces liaisons aux écarts rencontrés dans la valeur des distances S—O de la forme I et du solvate SII.

L'étude structurale revêt ici une importance particulière puisqu'elle prouve que le solvate SII est non seulement un monohydrate mais encore qu'il présente une formule structurale légèrement différente du sulfamétomidine lui-même. On peut donc supposer que le polymorphe II, obtenu après la perte de la molécule d'eau par traitement thermique de ce solvate, présente

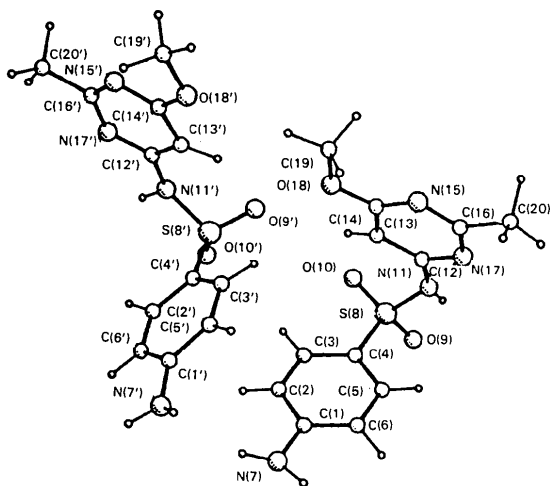


Fig. 1. Représentation des molécules de l'unité asymétrique de la forme I par le programme PLUTO (Motherwell & Clegg, 1978).

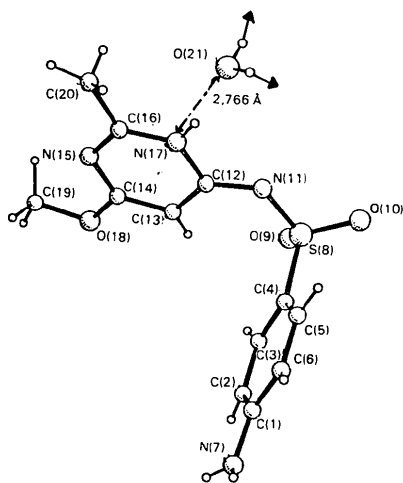


Fig. 2. Représentation de la molécule de l'unité asymétrique du solvate SII.

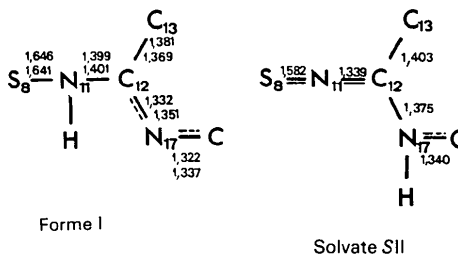


Fig. 3. Modifications structurales induites par le déplacement du proton amide. (Distances en Å.)

lui aussi un transfert du proton amide et donc n'est pas un vrai polymorphe mais plus exactement un isomère de la forme I.

Références

- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)
- KRUGER, G. J. & GAFNER, G. (1971). *Acta Cryst.* **B27**, 326–333.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1980). *MULTAN80. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. de York, Angleterre, et Louvain-la-Neuve, Belgique.
- MAURY, L., PAUVERT, B., RAMBAUD, J., AUDRAN, M., LASSERRE, Y. & BERGE, G. (1984). *Pharm. Acta Helv.* **59**(4), 112–117.
- MOTHERWELL, W. D. S. & CLEGG, W. (1978). *PLUTO*. Programme pour le dessin de structures cristallines et moléculaires. Univ. de Cambridge, Angleterre.
- RAMBAUD, J., ROQUES, R., DECLERQ, J.-P., GERMAIN, G. & SABON, F. (1981). *Bull. Soc. Chim. Fr.* pp. 1–153.
- SHELDRICK, G. M. (1976). *SHELX76*. Programme pour la détermination de structures cristallines. Univ. de Cambridge, Angleterre.

Acta Cryst. (1985). **C41**, 778–780

Structure of Pentathia[9]heterohelicene,* C₂₈H₁₂S₅

BY H. NAKAGAWA, H. NAGASHIMA, K. YAMADA AND H. KAWAZURA

Faculty of Pharmaceutical Sciences, Josai University, 1–1 Keyakidai, Sakado, Saitama 350-02, Japan

(Received 19 October 1984; accepted 12 November 1984)

Abstract. $M_r = 508.70$, monoclinic, $C2/c$, $a = 14.685$ (1), $b = 10.657$ (1), $c = 13.964$ (1) Å, $\beta =$

100.31 (1)°, $V = 2150.0$ (3) Å³, $Z = 4$, $D_m = 1.55$ (floatation), $D_x = 1.57$ g cm⁻³, $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.70926$ Å, $\mu = 5.34$ cm⁻¹, $F(000) = 1040$, $T = 297$ K, final $R = 0.062$ for 1054 unique observed reflections. The molecule, having a C_2 axis, displays a helical geometry

* Thieno[2,3-*l*:5,4-*l'*]bis(benzo[*d*]benzo[1,2-*b*:4,3-*b'*]dithiophene).